

Titre en français : Modélisation du transport quantique de la chaleur dans les hétérostructures 2D de « van der Waals » : vers une nouvelle génération de dispositifs pour la nanoélectronique

Titre en anglais : Quantum transport modeling of heat in 2D « van der Waals » heterostructures : towards a new generation of nanoelectronics devices

Nom du directeur de thèse : Marc Bescond

Nom du co-encadrant de thèse : Nicolas Cavassilas

Tel : 06 84 07 66 19

E-Mail : marc.bescond@cnr.fr

Laboratoire : Institut Matériaux Microélectronique Nanosciences de Provence (IM2NP)

Financement : demandé

Type de financement : Ministère

Résumé en français :

La miniaturisation des dispositifs électroniques vers l'échelle nanométrique a entraîné un effet d'auto-échauffement, très préjudiciable à leurs performances et leur consommation. Une gestion thermique efficace à l'échelle nanométrique représente de fait l'un des enjeux scientifiques, technologiques et environnementaux majeurs.

Nous avons récemment développé le premier code de transport quantique de phonons basé sur le formalisme des fonctions de Green de hors-équilibre (NEGF), validé expérimentalement [voir Réf. 1-3 pour plus de détails]. Sur la base de ce code et de calculs *ab initio*, le/la candidat/e étudiera théoriquement le transport de chaleur dans les hétérostructures de monocouches de dichalcogénures de métaux de transition. Les propriétés de ces systèmes étant ajustables par le choix des couches et de leurs orientations relatives, ils sont des candidats très prometteurs pour de nombreuses applications en nano/opto-électronique. Les questions concernant le transport des phonons, en particulier dans la direction perpendiculaire aux couches, restent des questions ouvertes et prometteuses. L'objectif final de la thèse est de concevoir de nouveaux dispositifs de taille moléculaire répondant aux enjeux cruciaux rencontrés dans l'industrie des semi-conducteurs en termes d'intégration et de dissipation de chaleur. La thèse se fera en étroite collaboration avec Dr. Sebastian Volz et Prof. M. Nomura du LIMMS, IRL CNRS de l'Université de Tokyo [4-5].

Résumé en anglais :

Electronic device downscaling led to self-heating effect, which is very detrimental for their performances and consumption. Efficient thermal management at the nanoscale then represents one of the major scientific, technological and environmental issues in a context of energy resource shortage.

We have recently developed the first experimentally validated quantum transport code of phonons expressed in the Non-Equilibrium Green's Function (NEGF) formalism [see Ref. 1-3 for more details]. Based on this code and atomistic *ab initio* calculations, the PhD candidate will theoretically investigate the heat transport in heterostructures of transition metal dichalcogenides. The properties of these systems being adjustable by the choice of the layers and their relative orientations, they are

promising candidates for various applications in opto/nano-electronics. The student will have to answer open questions about the transport mechanisms of phonons in those systems and develop molecular-sized devices combining electrical and thermal performances. The final objective of the PhD thesis is to design new devices which address the crucial issues faced by the semiconductor industry in terms of integration and heat dissipation. The thesis will be done in close collaboration with Dr. Sebastian Volz and Prof. M. Nomura from the LIMMS, IRL CNRS at the University of Tokyo [4-5].

Profil du candidat recherché : des connaissances en physique quantique et physique des semi-conducteurs seront appréciées, ainsi qu'un goût certain pour le codage informatique.

Publications sur le sujet :

- 1) Y. Guo, M. Bescond, Z. Zhang, M. Luisier, M. Nomura, and S. Volz, "Quantum mechanical modeling of anharmonic phonon-phonon scattering in nanostructures," *Phys. Rev. B*, **102**, 195412 (2020). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.102.195412>
- 2) Y. Guo, M. Bescond, Z. Zhang, S. Xiong, K. Hirakawa, M. Nomura, S. Volz, "Thermal conductivity minimum of graded superlattices due to phonon localization," *APL Materials* **9** (9), 091104 (2021). <https://doi.org/10.1063/5.0054921>
- 3) Y. Guo, Z. Zhang, M. Bescond, S. Xiong, M. Nomura, S. Volz, "Anharmonic phonon-phonon scattering at the interface between two solids by nonequilibrium Green's function formalism," *Phys. Rev. B* **103** (17), 174306 (2021). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.103.174306>
- 4) Y. Guo, Z. Zhang, M. Bescond, S. Xiong, M. Wang, M. Nomura, S. Volz, "Size effect on phonon hydrodynamics in graphite microstructures and nanostructures," *Phys. Rev. B* **104** (7), 075450 (2021). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.104.075450>
- 5) Z. Zhang, Y. Guo, M. Bescond, J. Chen, M. Nomura and S. Volz, "Heat Conduction Theory Including Phonon Coherence," *Phys. Rev. Lett.* **128**, 015901 (2022). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.128.015901>

Insertion professionnelle après thèse : Recherche publique (université, CNRS, CEA...), ingénieur R&D dans l'industrie des semi-conducteurs (ST Microelectronics, Intel), en électronique (Thales), et en informatique (position des anciens doctorants: Lead software engineer, Software design and development engineer...).